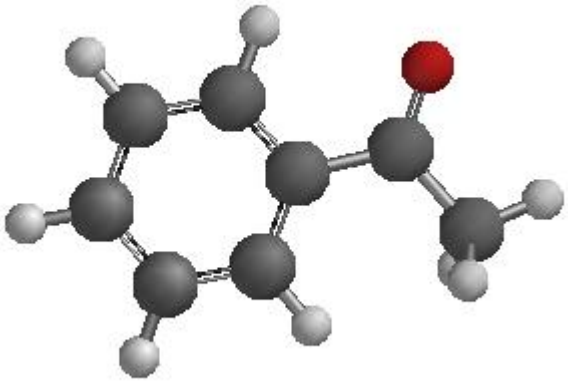
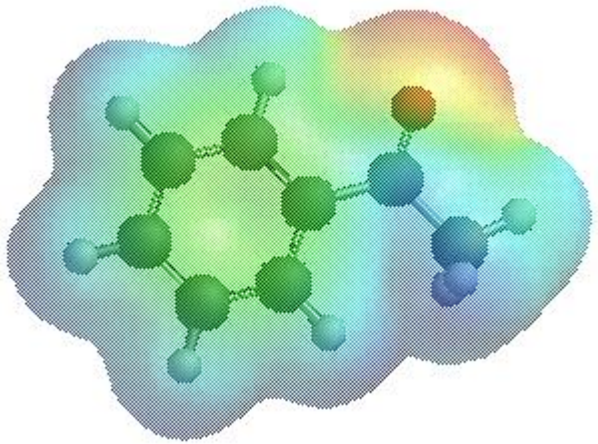
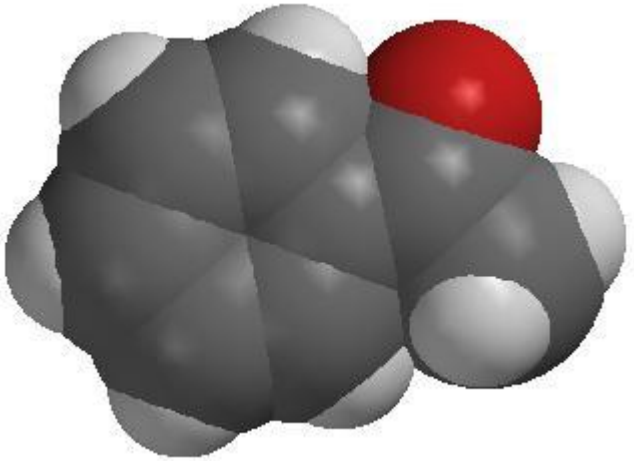




Chapter 4: Aromatic Compounds



© R. Spinney 2013

① خصائص البنزين:

1) Cyclic Compound
2) $6\,C$
3) $6\,H$
4) 3 double bond
5) $6\,\pi e^-$ سته عدد πe^- هو عدد $2 \times Db$
6) general form → C_6H_6
7) كل C تهجينهم sp^2 ← trigonal planar, 120° bond angle
8) يشتغل كـ نيوكليوفيل
9) 2 resonance structure that is equivalent in energy.
10) bond order = 1.5 ← جاي بالك انه
bond order Db → 1
bond order single bond → 2
← البنزين فعلياً بالنص

11) كل H ← chemically Equivalent ← يعني مثلاً كوبدي استبدل Br مع H طالعت أي وحده
ج / اختار / أنفهم كلهم نفس بعض.

12) يمتلك خاصية Resonance ← قيام الروابط الثنائية (π) بتغيير موقعها داخل الحلقة
بسرعة هائلة
اسم العالم اللي اكتشفه [Kekule]

* عشان هيك البنزين عنده 2 Resonance stru
↳ Equivalent in energy

* مع تطور العلم اكتشفنا انه

← انه هاض الشكل مش هو الشكل الحقيقي للبنزين لأنه طلع البنزين أصلاً عامله ٣ روابط double و ٣ روابط single الي فالواقع

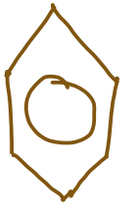
مثلياً هو خلطة انه فعلينا 3sb , 3db طلع عندي البنزين

← عندي الروابط اي هون بكون طولها جاي بالنص بين الأحادية والثنائية ← 1.9 [أقصر من sb وأطول من db].

[الطول لكل الروابط متساوي]

← تم تسميته بعدين بالـ Resonance hybrid structure

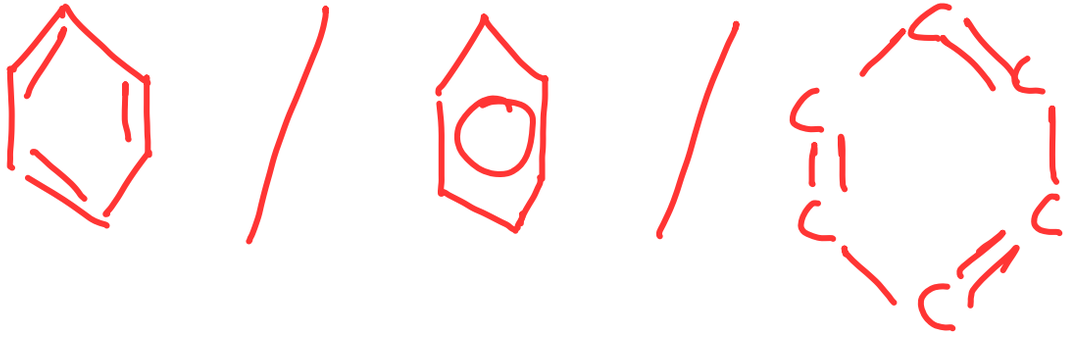
خليط



الشكل الحقيقي

للبنزين

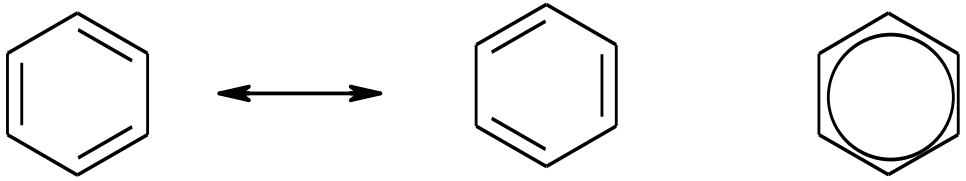
* هيك بالأصل متخيل مثلياً رح يجيبو البنزين بهاي الـ ٣ صور ←



General Properties

Benzene:

- formula: C_6H_6
- IHD: 4 (highly unsaturated)
- chemical reactivity: substitution, but only 1 product ∴ all H atoms must be equivalent
- structure: cyclic, planar, sp^2 hybridized
  - Benzene is cyclic, is planar,
  - has an interrupted cloud of π electrons,
  - and has three pairs of electrons in the π cloud.



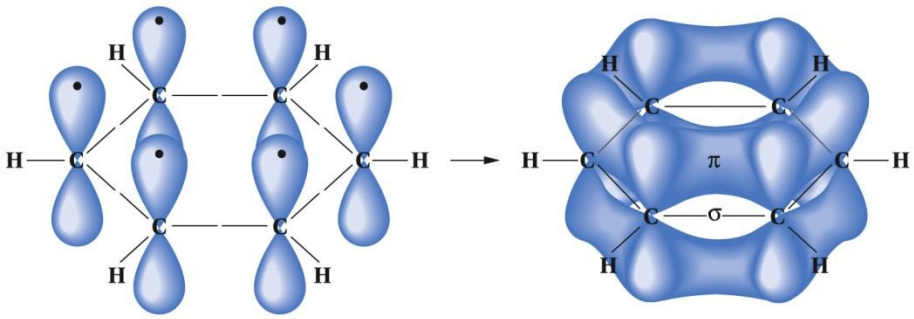
Kekule structure

Robinson structure

General Properties

Benzene:

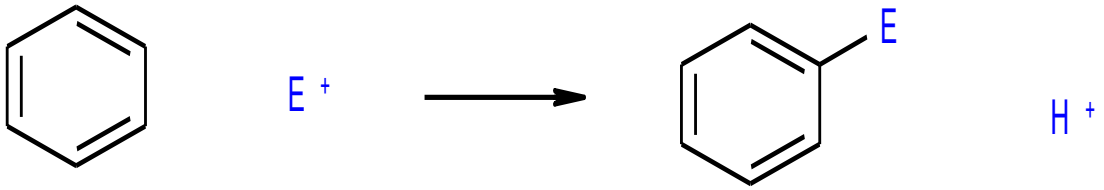
- C-C bond length: 1.39 Å
  - Intermediate to C-C (1.54 Å) and C=C (1.34 Å)
  - All C-C bond lengths are the same ➔ resonance!

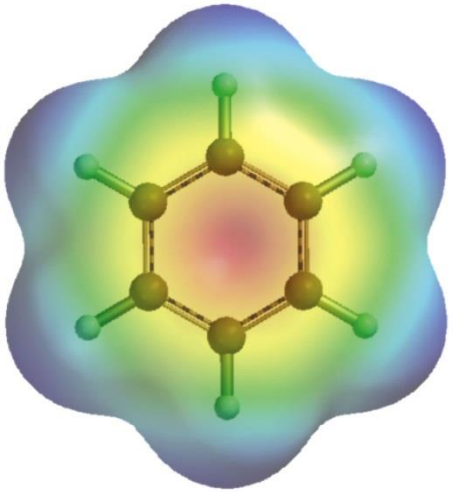


General Properties

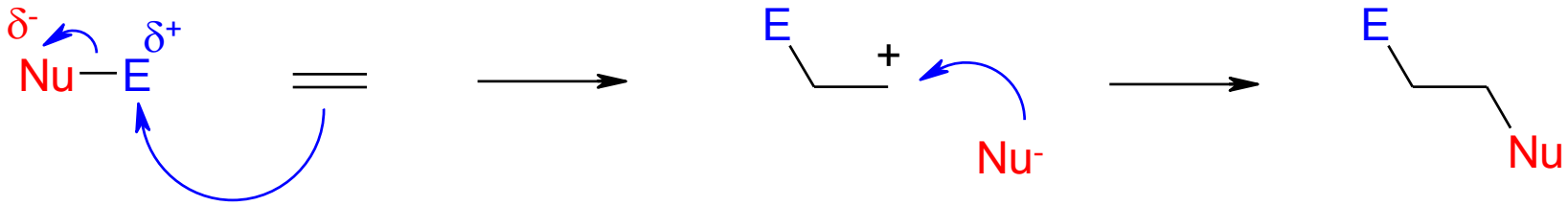
Benzene:

Chemical reactivity: electrophilic substitution





as opposed to electrophilic addition



General Properties

Why the difference between benzene and an alkene?

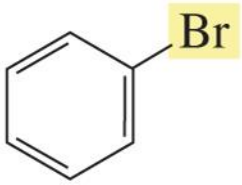
Aromaticity: the extra stability associated with aromatic compounds.

Aromatic compounds are:

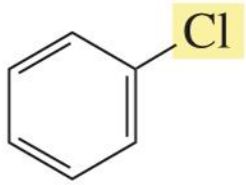
- Cyclic
- planar
- fully conjugated
- contain $4n + 2$ π electrons (n=1,2,3…) (Huckel's rule: equivalent to an odd number of π electrons pairs in the ring system).

Naming Monosubstituted Benzenes

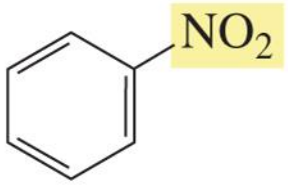
Some monosubstituted benzenes are named
by adding the name of the substituent to "benzene."



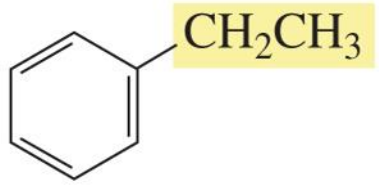
bromobenzene



chlorobenzene



nitrobenzene



ethylbenzene

Naming Monosubstituted Benzenes

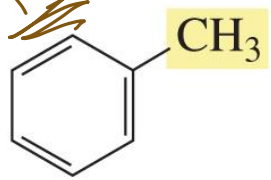
بشبه تسمية الـ Cycloalkane

مهم

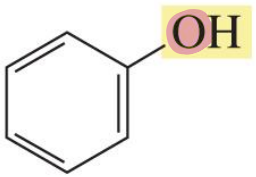
Some monosubstituted benzenes have names that incorporate the substituent.

[Common name] لبعض المشتقات

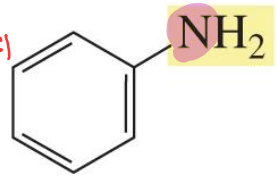
AlKyl Group عبارة عن هيدروكربون (عايكون هو متفرع)



toluene

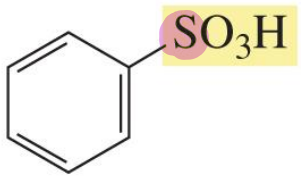


phenol



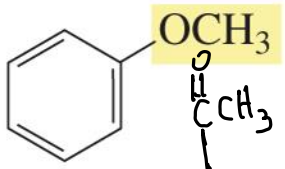
aniline

لـ اني لين

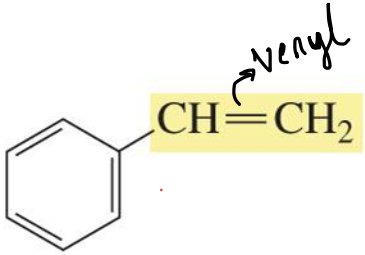


benzenesulfonic acid

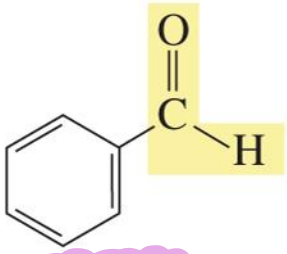
واحد قاعد بلون (تلوين) أو بنش احمر تولين



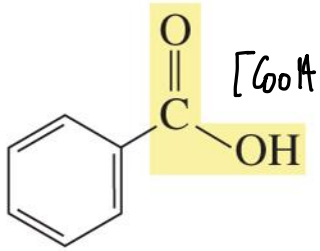
anisole



styrene

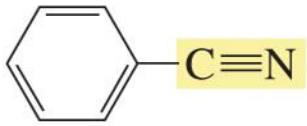


benzaldehyde



[GooH / Co2H]

benzoic acid



benzonitrile

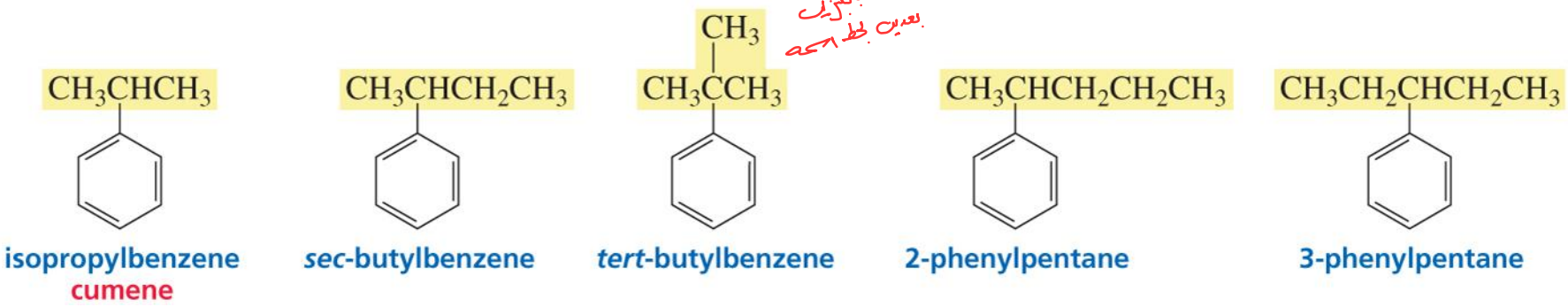
Acetophenone

Alkyl-Substituted Benzenes

[تفرع واحد] → Named as alkyl benzene.

← بتقوم بتركز مجموعة الألكيل المتصلة بالبنزين بعدين بتحط اسمه

← انتبه انه فاضل أتم قبل الاسم.



isopropylbenzene
cumene

sec-butylbenzene

tert-butylbenzene

2-phenylpentane

3-phenylpentane

Name as an alkyl-substituted benzene when the alkyl group has a name.

Otherwise, name as a phenyl-substituted alkane.

Toluene (methyl substituent on benzene) is an exception.

* هسه بالا متحان غالباً يجي البنزين الي عليه تفرعين وفوق

2) البنزين الي عليه تفرعين ؟

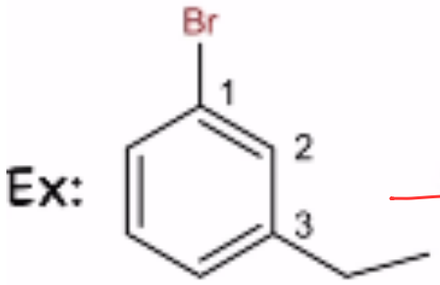
1) كلا من التفرعين not Common
2) واحد Common والثاني not Common
3) كلا منهم Common

---

① الحالة الأولى ؟

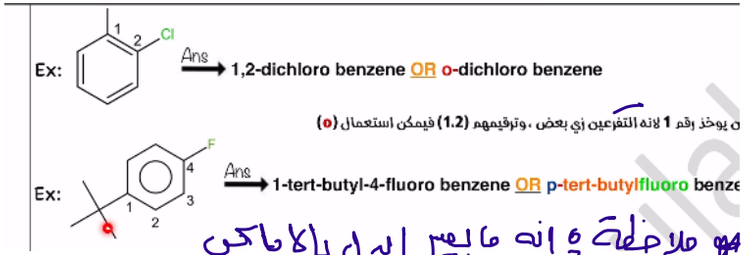
نسمه التفرع الي بوخذ رقم اهو التفرع الي اله الاولوية هجائياً بعدين برقم بحيث الثاني يوخذ أقل ترتيم .

Ex:



→ m-bromoethyl benzene / 1-bromo-3-Ethyl benzene

بالشين مح يعني بجيب بالخيارات واحد منهم بس



* ملاحظة ؟ انه ما بجيب ابدل بالاماكن بعدين رتب الحرف يعني احط methyl قبل choloro مثلاً

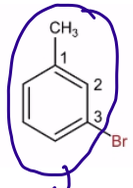
* هسه في البنزين ذو التفرعين فصل

يوجد حالة حلوة للتعبير عن مواقع التفرعات بالأحرف بدل التفرعات ؟

(ortho) o ← (1,2)
(meta) m ← (1,3)
(para) p ← (1,4)

الحالة الثانية (2

Common بتكون باسم التفرع الـ parent name و الـ not Common بعديين الـ Common هو لهون اللي رح يوخذ الترقيم الأول هو

Ex:  Ans → 3-bromotoluene OR m-bromotoulene

parent name 1,3

Lets Practice — Give the IUPAC names of the following compounds?

1 — parent name toluene — Sec-butyl

2 — benzoic

3 — benzaldehyde — C(CH3)3 tert butyl

4 — phenol — Isopropyl

5 — alinine — propyl

1 — 3-sec-butyltoluene

2 — 4-Ethylbenzoic / p-Ethylbenzoic

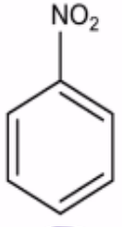
3 — 2-tert-butylbenzaldehyde

4 — 2-Isopropyl phenol

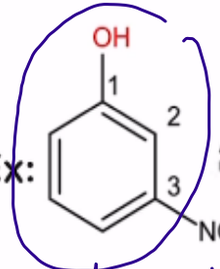
5 — 2-propyl alinine

* ملاحظة - في عندي تفرع جديد هو NO_2 اسمه (Nitro) ويعتبر Not common.

، هذا التفرع هو (NO2) واسمه (Nitro) ويعتبر تفرع (Not common) :

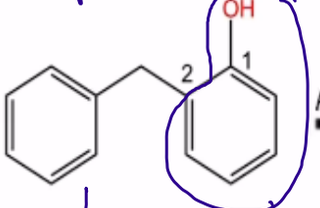
Ex: 

Ans → Nitrobenzene

Ex: 

Ans → 3-Nitrophenol OR m-Nitrophenol

↳ phenol

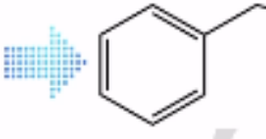
Ex: 

Ans → 2-Benzylphenol
OR o-benzylphenol

التفرع (benzyl) ← benzene ناقص CH_2

phenol [parent name]

Q: Give the common name of this compound ?



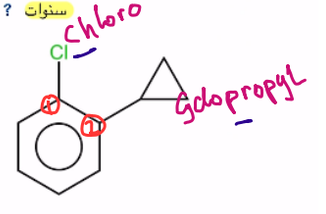
Ans → Benzyl Bromide

ال common name لاي مركب فيه هالوجين بشطب على الهالوجين ويسمي الي متصل فيه كتفرع وبحط للهالوجين على شكل ide

هيه من عندي

Q: What is the IUPAC name of this compound ? سنوات

A) o-chlorocyclopropylbenzene
B) o-cyclopropylchlorobenzene
C) chlorophenyl cyclopropane
D) cyclopropylchloro benzene



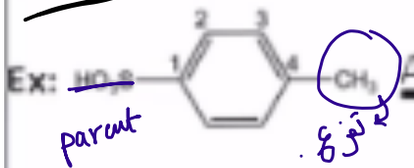
ج) الحالة (ب)

* يرتب من الأعلى أولوية للأقل
أولوية والأعلى أولوية هو
الي بكون parent name

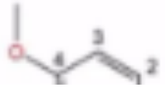
① $-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-OH$ ، $-SO_3H$ ، $-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-H$ ، $-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_3$ ، $-OH$ ، $-NH_2$ ، $-OCH_3$ ، $-CH_3$

الأعلى أولوية ⟵ الأقل أولوية

لسنوات



هنا الـ(SO3H) هي التي تأخذ رقم 1 ونسمي المركب باسمها(benzene sulfonic acid) لان لها اولوية على الـ(CH3) حسب الترتيب فوق



تفرع ← Commones

OCH_3 ← methoxy

NH_2 ← Amino

$-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_3$ ← oxo

$-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-H$ ← Formyl

التمرين الي عليه ٣ تفرعات: [مهم]

* لا نستخدم [O, P, M] هون بس بستعلم بأبو التفرعين

- كل التفرعات Not Common
- واحد Common أو أكثر

---

① الحالة الأولى:-

* نفس تسمية Cycloalkane الي بـ ch2

* باختصار نختار ٢ رقم ابعدين بحيث الترقيم بناء أعلى الترتيب الي بعطي أقل ترقيم و الـ ٢ رقم ابوخذ نختارها بناء أعلى الي رح تعطينا أقل ترقيم
وإذا تساوى الترقيم بلجأ الهجائي

---

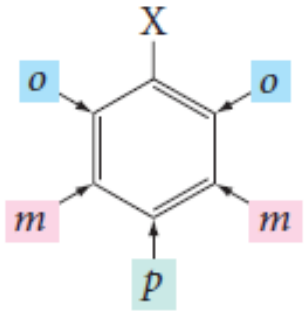
② الحالة (2):-

* الـ Common هو الي بوخذ رقم ابعدين برقم حسب الترقيم الأصغر

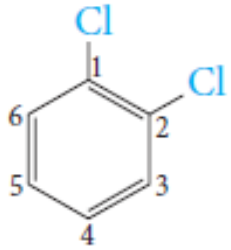
* إذا كان في عندي Common 2 الي بتوخذ رقم (1) حسب الأولوية بتكون بعدين الي بتوخذ رقم 2 هي الي بتعطي الترقيم الأصغر.

* في طريقة كنا نوخذها أيام الدراسة عشان نطلع الأصغر ترقيم هي انه نجمع الأرقام و الترقيم الي بعطي المجموع الأصغر هو الي بوخذه
مثل
1) 1+6+4 = 13
2) 1+3+5 = 9

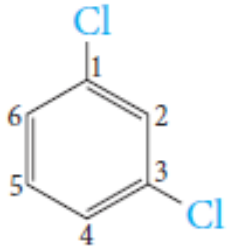
When two substituents are present, three isomeric structures are possible.



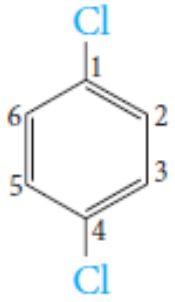
Specific examples are



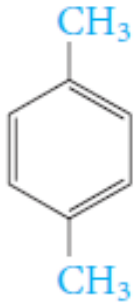
ortho-dichloro-benzene



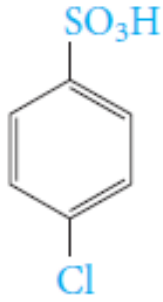
meta-dichloro-benzene



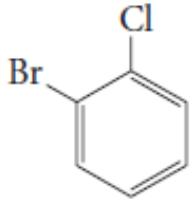
para-dichloro-benzene



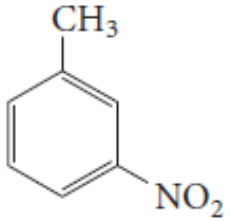
para-xylene**



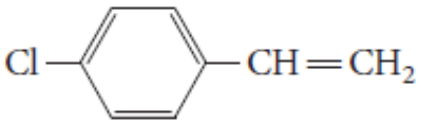
para-chlorobenzene-sulfonic acid



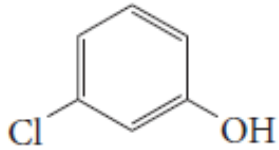
o-bromochlorobenzene
(note alphabetical order)



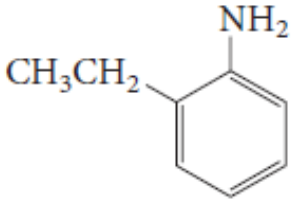
m-nitrotoluene



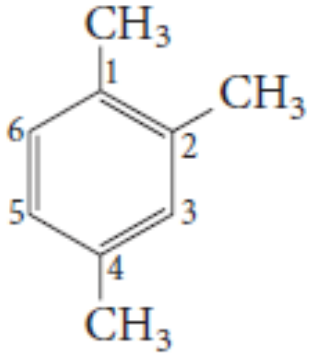
p-chlorostyrene



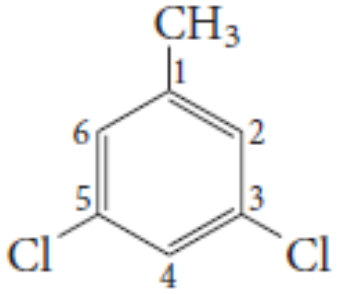
m-chlorophenol



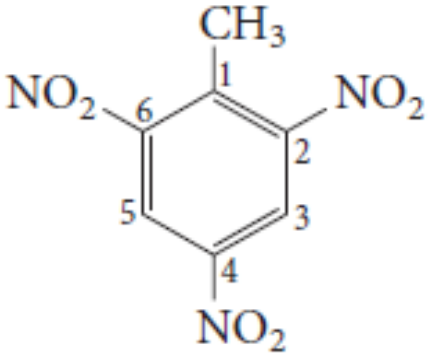
o-ethylaniline



1,2,4-tri-
methylbenzene



3,5-dichlorotoluene

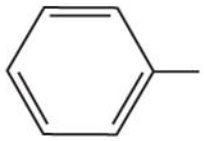


2,4,6-trinitrotoluene
(TNT)

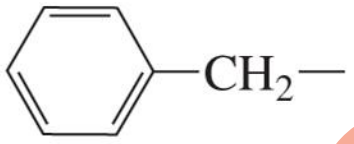
Phenyl and Benzyl Substituents

لـ ما يكون البنزين هو Alkyl Group

Alkane $\xrightarrow{-H}$ Alkyl Group



phenyl group (ph)



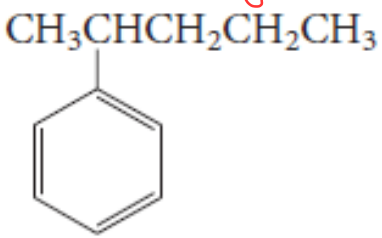
benzyl group $[C_6H_5CH_2]$

* البنزين ما يكون تفرع لازم يكون موجود على شكل ١ مع هيدروكربون

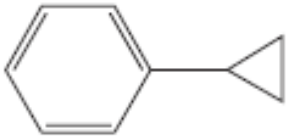
لـ هو يشيل الـ H من المجموعة اللي متصلة بالـ CH_2 و benzene

لـ شيلنا منه ١H فبتبقى أطول سلسلة هيدروكربونية من المكان اللي شيلنا منه H

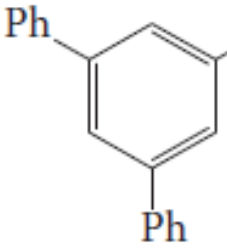
$[C_6H_5]$



2-phenylpentane
(or 2-pentylbenzene)



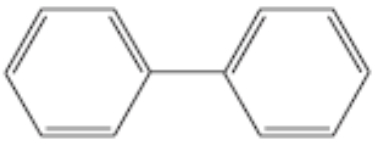
phenylcyclopropane
(or cyclopropylbenzene)



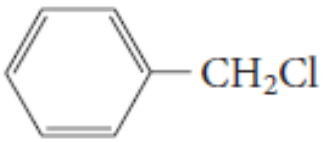
1,3,5-triphenylbenzene

phenyl ← إذا كان في أكثر من تفرع

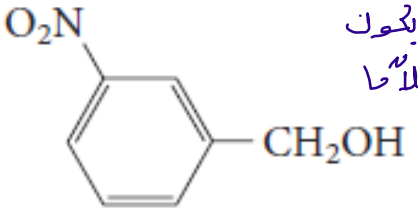
benzyl ← إذا كان في مع عوامل تعقد التفرع.



biphenyl



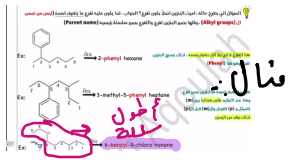
benzyl chloride



m-nitrobenzyl alcohol

* يكون البنزين تفرع كما يكون متصل باتي اهنا أصلاً ما يتغير اسمه

مثال:



* هنا إذا كان في تفرعات في ال phenyl يعني حسب الحروف الأبجدية يعني مثلاً z/ أحط p قبل m لأن phenyl قبل Methyl